

ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР ТА ГУСТИНА СТАНІВ ЕЛЕКТРОНІВ У НЕВПОРЯДКОВАНІЙ МОДЕЛІ СИЛЬНОГО ЗВ'ЯЗКУ З БЕЗЛАДОМ ЗМІЩЕНЬ

О. М. Возняк

*Прикарпатський університет імені Василя Стефаника,
кафедра фізики твердого тіла,
вул. Шевченка, 57, Івано-Франківськ, 76025, Україна*

(Отримано 16 січня 2007 р.; в остаточному вигляді — 7 лютого 2007 р.)

У наближенні квадратичному за зміщеннями атомів від вузлів ідеальної кристалічної ґратки одержано рівняння для одноелектронної функції Гріна і знайдено його розв'язок. Розрахунки енергетичного спектра, його загасання та густини станів виконано для лінійного ланцюжка атомів. Зроблено висновки про залежність характеристик зонного спектра від ступеня неупорядкування.

Ключові слова: енергетичний спектр, густина станів, безлад зміщень.

PACS number(s): 71.23.–k, 73.21.–b

I. ВСТУП

Дослідження неупорядкованих систем мають уже багатолітню історію [1–3]. У цій галузі одержано багато важливих результатів та є ціла низка дослідних методик. Серед них такі теоретичні схеми, як наближення жорстких зон, когерентного потенціалу, віртуального кристала, за допомогою яких отримано більшість найвагоміших результатів у цій ділянці.

Водночас для неупорядкованих систем характерною є значно більша різноманітність їхніх властивостей та об'єктів дослідження, аніж для ідеальних кристалів. Тому ця галузь фізики є такою, що постійно розвивається, а в уже відомих явищах виявляються раніше невідомі аспекти. Наприклад, пошук нових напівпровідників часто здійснюють у напрямку синтезу складних багатокомпонентних матеріалів. Інтерес до них зумовлений не лише можливістю поєднання в них найрізноманітніших фізичних властивостей, але й можливістю керувати ними, змінюючи їхній склад. Поряд із прикладним значенням вивчення таких матеріалів сприяє висвітленню загальних фізичних закономірностей і механізмів електронних процесів, які відбуваються у твердих тілах взагалі і, як виявилось, у неупорядкованих зокрема. Так, наприклад, композиційну неупорядкованість вивчають уже давно. Проте лише недавно з'ясували, що в кристалах складних сполук, як наприклад $\text{InAs}_x\text{Sb}_{1-x}$, $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ чи $\text{InSb}_{1-x}\text{Bi}_x$, у яких спостерігається така неупорядкованість стосовно атомів (наприклад As і Sb у $\text{InAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ або Sb і Bi у $\text{InSb}_{1-x}\text{Bi}_x$, залежність ширини забороненої зони від умісту компонент є складною. Зокрема, ця ширина може бути більшою, аніж ширина забороненої зони будь-якого із складників, наприклад, InSb і InAs. Таке явище, що одержало назву композиційного прогину ширини забороненої зони, досліджували в багатьох працях і, зокрема, в роботах [4,5].

Значно менше вивченими є неупорядковані системи з безладом зміщень, неупорядкованість яких пов'язана з випадковими статичними зміщеннями ато-

мів із вузлів ідеальної ґратки. Таку модель розглядали, аналізуючи енергетичний спектр поверхні твердого тіла й тонких плівок [6,7]. Цей тип неупорядкованості був виявлений також і у кристалах багатокомпонентних оксидних сполук, що мають п'єзоелектричні, сегнетоелектричні чи феромагнетні властивості [8–10], у яких атоми деяких сортів зазнають випадкових зміщень із рівноважних положень. Саме такими зміщеннями пояснюється, зокрема, дифузне розсіювання рентгенівського випромінювання цими кристалами, що проявляється в розширенні дифракційних ліній [10].

У нашій роботі неупорядковану систему з безладом зміщень досліджено методом двочасових температурних функцій Гріна у схемі сильного зв'язку. Така модель дає змогу врахувати на основі контрольованих наближень вплив неупорядкування на електронний енергетичний спектр системи та його властивості.

II. ГАМІЛЬТОНІЯН СИСТЕМИ

Розгляньмо одноелектронну задачу з гамільтоніаном

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}), \quad (1)$$

де $V(\mathbf{r}) = \sum_l V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l)$, \mathbf{R}_l — радіус-вектори, що визначають положення атомів твердого тіла.

Для гамільтоніяна (1) побудуємо представлення вторинного квантування, вибравши базисними функціями атомні хвильові функції. Для спрощення використаємо лише одну таку функцію, а для визначеності приймімо її атомною хвильовою функцією s -стану. Атомні функції різних вузлів вважатимемо наближено ортогональними. Тоді

$$\hat{H} = \sum_{i,j} H_{ij} a_i^\dagger a_j, \quad (2)$$

де $H_{ij} = \int \psi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \hat{H} \psi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) dV \approx \varepsilon_s \delta_{ij} + V(|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|)$, $V(|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|) = \int \psi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) dV \equiv V_{ij}$, $\psi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ — атомна хвильова функція i -го атома, \mathbf{R}_i — радіус-вектор i -го атома, $a_i^\pm(a_j)$ — оператори породження (знищення) електрона на $i(j)$ -му атомі.

Якщо атоми твердого тіла зміщені з рівноважних положень \mathbf{R}_l^0 на величину \mathbf{u}_l , то $\mathbf{R}_l = \mathbf{R}_l^0 + \mathbf{u}_l$. Тоді матричні елементи оператора $V(\mathbf{r})$ у лінійному за зміщеннями наближенні будуть

$$V(|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|) \approx V(|\mathbf{R}_i^0 - \mathbf{R}_j^0|) + \sum_{\gamma} (u_i^\gamma - u_j^\gamma) V^\gamma(\mathbf{R}_i^0 - \mathbf{R}_j^\gamma), \quad (3)$$

де $V^\gamma(\mathbf{R}_i^0 - \mathbf{R}_j^0) = \frac{\partial}{\partial (R_i^0)^\gamma} V(|\mathbf{R}_i^0 - \mathbf{R}_j^0|)$, і оскільки похідна від парної функції є функцією непарною, то

$$V^\gamma(\mathbf{R}_i^0 - \mathbf{R}_j^0) = -V^\gamma(\mathbf{R}_j^0 - \mathbf{R}_i^0). \quad (4)$$

Тоді гамільтоніан системи буде таким:

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}', \quad (5)$$

де $\hat{H}^0 = \sum_{i,j} H_{ij}^0 a_i^+ a_j$,

$H_{ij}^0 = \varepsilon_s \delta_{ij} + V(|\mathbf{R}_i^0 - \mathbf{R}_j^0|)$, $\hat{H}' = \sum_{i,j,\gamma} (u_i^\gamma - u_j^\gamma) V_{ij}^\gamma a_i^+ a_j$.

III. РІВНЯННЯ ДЛЯ ФУНКЦІЙ ГРІНА ТА ЙОГО РОЗВ'ЯЗОК

Енергетичний спектр системи знайдемо з функції Гріна $G_{i,j} = \langle \langle a_i | a_j^+ \rangle \rangle$, рівняння для якої в енергетичному зображенні є таким:

$$E \langle \langle a_i | a_j^+ \rangle \rangle_E = \langle [a_i, a_j^+] \rangle + \langle \langle [a_i, \hat{H}] | a_j^+ \rangle \rangle_E. \quad (6)$$

Для гамільтоніяна (5) воно набуває вигляду:

$$E G_{i,j} = \delta_{i,j} + \sum_n H_{in}^0 G_{n,j} + \sum_{n,\gamma} (u_i^\gamma - u_n^\gamma) V_{in}^\gamma G_{n,j}. \quad (7)$$

Здійснивши перехід у k -простір, для функції $G_{k,k'} = \frac{1}{N} \sum_{i,j} e^{-ik\mathbf{R}_i^0} G_{i,j} e^{ik'\mathbf{R}_j^0}$ одержимо таке рівняння:

$$(E - H^0(\mathbf{k})) G_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q},\gamma} u^\gamma(\mathbf{k} - \mathbf{q}) (V^\gamma(\mathbf{q}) - V(\mathbf{k})) G_{\mathbf{q},\mathbf{k}'}, \quad (8)$$

де $H^0(\mathbf{k})$, $V^\gamma(\mathbf{k})$ і $u^\gamma(\mathbf{k})$ — фур'є-зображення матричних елементів H_{ij}^0 , V_{ij}^γ і зміщення u_i^γ . Рівняння (8) містить величини $u^\gamma(\mathbf{k} - \mathbf{q}) G_{\mathbf{q},\mathbf{k}'}$, для яких слід записати нові рівняння, що матимуть подібні конструкції вищих порядків. Ці рівняння утворюють ланцюжок взаємопов'язаних рівнянь, для яких можна знайти лише наближений розв'язок. Ми також скористаємося наближеним методом, що базується на використанні конфігураційно-усереднених функцій Гріна

й обриві ланцюжка рівнянь за допомогою апроксимації вищих функцій Гріна нижчими. Застосувавши метод послідовних наближень для конфігураційно-усереднених функцій Гріна, одержимо

$$\begin{aligned} (E - H^{(0)}(\mathbf{k})) \overline{G_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}} &= \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \\ + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q},\gamma} \frac{V^\gamma(\mathbf{q}) - V^\gamma(\mathbf{k})}{E - H^0(\mathbf{q})} \overline{u^\gamma(\mathbf{k} - \mathbf{q})} \delta_{\mathbf{q},\mathbf{k}'} \\ + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}',\gamma,\gamma'} \frac{(V^\gamma(\mathbf{q}) - V^\gamma(\mathbf{k}))(V^{\gamma'}(\mathbf{q}') - V^{\gamma'}(\mathbf{q}))}{E - H^0(\mathbf{q})} \\ \times \overline{u^\gamma(\mathbf{k} - \mathbf{q}) u^{\gamma'}(\mathbf{q} - \mathbf{q}') G_{\mathbf{q}',\mathbf{k}'}}. \end{aligned} \quad (9)$$

До виразу $\overline{u^\gamma(\mathbf{k} - \mathbf{q}) u^{\gamma'}(\mathbf{q} - \mathbf{q}') G_{\mathbf{q}',\mathbf{k}'}}$ рівняння (9) застосуємо розщеплення, що запропонував для аморфних магнетиків Канейоші [11], яке часто використовують у теорії спінових і електронних систем [12, 13]. У цьому наближенні різні \mathbf{u}_i вважаються незалежними, їх середнє значення, усереднене по всій системі, дорівнює нулеві, а

$$\overline{u^\gamma(\mathbf{k} - \mathbf{q}) u^{\gamma'}(\mathbf{q} - \mathbf{q}') G_{\mathbf{q}',\mathbf{k}'}} \approx \frac{\overline{u^\gamma(\mathbf{k} - \mathbf{q}) u^{\gamma'}(\mathbf{q} - \mathbf{q}')}}{\overline{G_{\mathbf{q}',\mathbf{k}'}}} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{q}'} \delta_{\gamma,\gamma'}. \quad (10)$$

Уважаючи, що розподіл зміщень $|\mathbf{u}_i|$ можна описати функцією Гаусса, знайдемо, що $\overline{u^\gamma(k - q)} = 0$, а $\overline{u^\gamma(\mathbf{q}) u^\gamma(-\mathbf{q})} = (u^\gamma)^2$. Тоді рівняння для усереднених функцій Гріна набуває вигляду:

$$\begin{aligned} \left(E - H^0(\mathbf{k}) - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q},\gamma} \overline{(u^\gamma)^2} \frac{(\tilde{V}^\gamma(\mathbf{q}) - \tilde{V}^\gamma(\mathbf{k}))^2}{E - H^0(\mathbf{q})} \right) \\ \times \overline{G_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}} = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}, \end{aligned} \quad (11)$$

а його розв'язком є

$$\overline{G_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}} = \frac{\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}}{E - H^0(\mathbf{k}) - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q},\gamma} \overline{(u^\gamma)^2} \frac{(\tilde{V}^\gamma(\mathbf{q}) - \tilde{V}^\gamma(\mathbf{k}))^2}{E - H^0(\mathbf{q})}}. \quad (12)$$

У (11) і (12) враховано, що оскільки V_{ij}^γ є непарною функцією, то $V^\gamma(\mathbf{k}) = i\tilde{V}^\gamma(\mathbf{k})$.

Рівняння ж для спектра має вигляд

$$E - H^0(\mathbf{k}) - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q},\gamma} \overline{(u^\gamma)^2} \frac{(\tilde{V}^\gamma(\mathbf{q}) - \tilde{V}^\gamma(\mathbf{k}))^2}{E - H^0(\mathbf{q})} = 0. \quad (13)$$

Доданок

$$\sum(\mathbf{k}, E) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q},\gamma} \overline{(u^\gamma)^2} \frac{(\tilde{V}^\gamma(\mathbf{q}) - \tilde{V}^\gamma(\mathbf{k}))^2}{E - H^0(\mathbf{q})} \quad (14)$$

у (13) є таким, що відповідає другому порядку теорії збурень і при малих зміщеннях відіграє ту ж роль,

що й масовий оператор квантової теорії поля. Він має особливості на дійсній осі, виділити які можна, зробивши заміну $E = E + i\delta$. Тоді

$$\sum(\mathbf{k}, E) = \sum'(\mathbf{k}, E) - i \sum''(\mathbf{k}, E).$$

Дійсна частина $\sum'(\mathbf{k}, E)$ дорівнює

$$\sum'(\mathbf{k}, E) = \frac{1}{N} P \sum_{\mathbf{q}, \gamma} \frac{\overline{(u^\gamma)^2} (\tilde{V}^\gamma(\mathbf{q}) - \tilde{V}^\gamma(\mathbf{k}))^2}{E - H^0(\mathbf{q})}, \quad (15)$$

визначає зміни спектра, пов'язані зі зміщеннями атомів із рівноважних положень. Уявна ж частина

$$\begin{aligned} \sum''(\mathbf{k}, E) &= \frac{\pi}{N} \sum_{\mathbf{q}, \gamma} \overline{(u^\gamma)^2} (\tilde{V}^\gamma(\mathbf{q}) - \tilde{V}^\gamma(\mathbf{k}))^2 \\ &\times \delta(E - H^0(\mathbf{q})) \end{aligned} \quad (16)$$

пов'язана зі загасанням спектра.

Важливою характеристикою енергетичного стану електрона в неупорядкованій системі є його густина станів. Вона доступна для безпосереднього експериментального визначення, за її допомогою можна встановити ряд важливих характеристик системи, і крім того, вона належить до самоусереднених величин. Густина електронних станів виражається через функцію Гріна, як $\rho(E) = \text{Sp Im } G_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$.

Узявши шпур від уявної частини функції Гріна, одержимо

$$\rho(E) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\sum''(\mathbf{k}, E)}{(E - H^0(\mathbf{k}) - \sum'(\mathbf{k}, E))^2 + (\sum''(\mathbf{k}, E))^2}. \quad (17)$$

IV. ОДНОВИМІРНА ҐРАТКА

Для прикладу застосуємо одержані результати до одновимірного ланцюжка атомів з постійною ґратки a . Врахувавши взаємодію лише між найближчими сусідами й непарність функції $V^\gamma(\mathbf{r})$, знайдемо, що

$$\begin{aligned} \tilde{V}^\gamma(q) &= \text{Im} \sum_i V^\gamma(R_i) e^{-iqR_i} \\ &= -2V_{i, i+1}^\gamma \sin qa = -2V^\gamma \sin qa. \end{aligned} \quad (18)$$

Спектр упорядкованого ланцюжка атомів, для якого $\Sigma(q, E) = 0$, визначаємо виразом

$$H^0(q) = \varepsilon_s - 2V \cos qa. \quad (19)$$

Тоді

$$\begin{aligned} \sum'(k, E) &= \frac{2 \sum_{\gamma} \overline{(u^\gamma)^2} (V^\gamma)^2}{\pi} \\ &\times \int_{-\pi}^{+\pi} \frac{\sin^2 qa + \sin^2 ka + 2 \sin ka \sin qa}{E - \varepsilon_s + 2V \cos qa} d(qa). \end{aligned} \quad (20)$$

Виконавши інтегрування, знайдемо, що при $(E - \varepsilon_s)^2 < 4V^2$,

$$\sum'(k, E) = \frac{\sum_{\gamma} \overline{(u^\gamma)^2} (V^\gamma)^2}{V^2} (E - \varepsilon_s) = c(E - \varepsilon_s). \quad (21)$$

$\sum'(k, E)$ у виразі (21) визначена через безрозмірну величину $c = \frac{\sum_{\gamma} \overline{(u^\gamma)^2} (V^\gamma)^2}{V^2}$, якою можна характеризувати міру безладу в системі. Урахувавши (21), спектр набирає вигляду

$$E = \varepsilon_s - 2 \frac{V}{1-c} \cos ka. \quad (22)$$

Відзначимо, що вираз (22) описує розширення енергетичних зон, характерне для топологічно неупорядкованих систем (див., наприклад [14, 15]).

При умові $(E - \varepsilon_s)^2 > 4V^2$

$$\begin{aligned} \sum'(k, E) &= \frac{-c}{\sqrt{(E - \varepsilon_s)^2 - 4V^2}} \\ &\times ((E - \varepsilon_s)^2 - 4V^2 - 4V^2 \sin^2 ka) + c(E - \varepsilon_s), \end{aligned} \quad (23)$$

а рівняння для спектра є таким:

$$\begin{aligned} (E - \varepsilon_s)(1-c) + 2V \cos ka &= -\frac{c}{\sqrt{(E - \varepsilon_s)^2 - 4V^2}} \\ &\times ((E - \varepsilon_s)^2 - 4V^2 - 4V^2 \sin^2 ka). \end{aligned} \quad (24)$$

Його наближені розв'язки, коли $|E - \varepsilon_s|$ близьке до $2V$, при $E = \varepsilon_s + 2V + \Delta E$

$$\Delta E = c^2 V \frac{\sin^4 ka}{(1-c + \cos ka)^2}, \quad (25)$$

і при $E = \varepsilon_s - 2V - \Delta E$

$$\Delta E = c^2 V \frac{\sin^4 ka}{(1-c - \cos ka)^2}, \quad (26)$$

збігаються із чисельним розв'язком рівняння (24) у всіх точках, крім особливих точок виразів (25) і (26), із яких видно, що ці поправки містять лише наступні від урахованих у цій роботі внески. Тому в наближенні, прийнятому в роботі, поправки до спектра при умові $(E - \varepsilon_s)^2 > 4V^2$ відсутні.

Загасання спектра визначається уявною частиною масового оператора, який для лінійного ланцюжка атомів набирає вигляду

$$\begin{aligned} \Sigma''(k, E) &= 2cV^2 \int_{-\pi}^{\pi} (\sin^2 qa + \sin^2 ka + 2 \sin ka \cdot \sin qa) \\ &\times \delta((E - \varepsilon_s) + 2V \cos qa) d(qa). \end{aligned} \quad (27)$$

Виконавши інтегрування, знайдемо, що

$$\sum''(k, E) = c \frac{4V^2(1 + \sin^2 ka) - (E - \varepsilon_s)^2}{\sqrt{4V^2 - (E - \varepsilon_s)^2}}. \quad (28)$$

Як випливає із (28), загасання в системі є, якщо $(E - \varepsilon_s)^2 < 4V^2$, а, підставивши у (28) вираз для спектра, знайдемо, що в наближенні, квадратичному

за зміщеннями, воно дорівнює:

$$\Gamma = 4cV |\sin ka|. \quad (29)$$

Густину станів знайдемо із (17), підставивши відповідні вирази для дійсної та уявної частини масового оператора,

$$\rho(E) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{\sum''(k, E)}{((E - \varepsilon_s) + 2V \cos ka - \sum'(k, E))^2 + (\sum''(k, E))^2}. \quad (30)$$

Зважаючи на те, що $\sum'(k, E) = c(E - \varepsilon_s)$, а $\sum''(k, E) = 4cV |\sin ka|$, одержимо для $\rho(E)$ такий вираз:

$$\rho(E) = \frac{2c}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d(ka) \frac{V |\sin ka|}{((E - \varepsilon_s)(1 - c) + 2V \cos ka)^2 + (4V \sin ka)^2}. \quad (31)$$

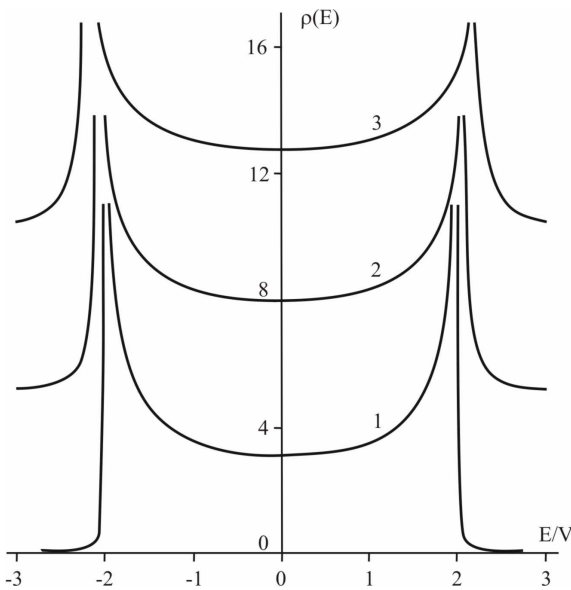


Рис. 1. Густина станів електронів як функція безрозмірної енергії $(E - \varepsilon_s)/V$ при $\varepsilon_s = 0$ для різних значень ступеня безладу $c = \Sigma_{\gamma}(u\gamma)^2 (V\gamma)^2 / V^2$, $c = 0.01$ — крива 1, $c = 0.05$ — крива 2, $c = 0.1$ — крива 3.

Результати числового розрахунку густини станів зображено на рисунку, на якому графік кожної на-

ступної залежності $\rho(E)$ зміщений щодо попереднього на п'ять одиниць уздовж осі ординат.

ВИСНОВКИ

Для неупорядкованої системи з безладом зміщень у моделі сильного зв'язку з базисом атомних функцій s -стану одержано рівняння для функції Гріна і в наближенні, квадратичному за зміщеннями атомів від рівноважного положення, знайдено його розв'язок. Усереднена за всіма конфігураціями функція Гріна використана для знаходження спектра, його загасання та густини станів одновимірного ланцюжка атомів. Установлено, що ширина зони, яка описується виразом (22), лінійно зростає зі збільшенням ступеня безладу. Загасання спектра також лінійно зростає зі збільшенням безладу, а густина станів при зміні ступеня безладу характер своєї поведінки змінює мало, зокрема, на границі зони вона, як це характерно для одновимірних систем, різко зростає, а потім швидко спадає. При цьому її значення зі збільшенням ступеня неупорядкування зменшується, а інтервал енергій, у якому її визначено, розширюється.

Автор висловлює подяку професорам І. О. Вакарчукові та В. М. Ткачукові за увагу до роботи й обговорення її результатів.

[1] Н. Мотт, *Електрони в неупорядочених структурах* (Мир, Москва, 1969).
 [2] Дж. Займан, *Моделі беспорядка* (Мир, Москва, 1982).
 [3] В. Ф. Лось, С. П. Релецький, *Методи теорії неупорядочених систем* (Наукова думка, Київ, 1995).
 [4] В. Г. Дейбук, Я. И. Виклюк, *Физ. техн. полупровод.* **36**, 1171 (2002).

[5] Я. І. Виклюк, В. Г. Дейбук, *Журн. фіз. досл.* **6**, 329 (2002).
 [6] В. Е. Егорушкин, Е. В. Савушкин, *Изв. вузов, физика* **8**, 81 (1998).
 [7] В. Е. Егорушкин, Н. В. Мельникова, *Журн. эксп. теор. физ.* **103**, 189 (1993).
 [8] V. Yu. Pomyakushin *et al.*, *Phys. Rev.* **6**, 184412 (2002).

- [9] D. Nokeda *et al.*, cond-mat/9910066 (2006).
[10] B. D. Chappmann *et al.*, Phys. Rev. B **71**, 020102 (2005).
[11] T. Kaneyoshi, Phys. Stat. Sol. B **118**, 757 (1983).
[12] I. O. Vakarchuk, V. M. Myhal, V. M. Tkachuk, Phys. Stat. Solidi (b) **185**, 101 (1994).
[13] О. М. Возняк, Журн. фіз. досл. **9**, 168 (2005).
[14] В. В. Бурмістров, О. І. Наконечна, І. В. Плющай, Вісн. Київ. ун-ту. Сер. фіз. **3**, 310 (1995).
[15] І. В. Плющай, В. А. Макара, М. І. Захарченко, О. І. Наконечна, Доп. НАН України **8**, 84 (1999).

**ENERGY SPECTRUM AND DENSITY OF STATES
FOR A DISORDERED TIGHT-BINDING MODEL WITH DISPLACEMENTS DISORDER**

O. M. Voznyak

*The Pre-Carpatian Vasyl Stefanyk University, Chair of Solid State Physics,
57 Shevchenko St., Ivano-Frankivsk, UA-76025, Ukraine*

An equation for one-electron Green's function has been obtained and its solution has been found within the quadratic approximation for the atomic displacements from the sites of a regular crystal lattice. A calculation of the energy spectrum, its damping and density of states has been performed for a linear atomic chain. A relation of the characteristics of the band spectrum on the degree of disorder has been found.